

单晶冰动态力学行为的分子动力学模拟

殷秋运^{1*}, 胡玲玲¹, 吴先前²

(1.中山大学航空航天学院, 广东 广州 510275;

2..中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要: 本文通过分子动力学方法研究了高应变率均匀压缩加载情况, 单晶冰在不同初始温度条件下的动态力学响应行为。研究表明, 对于单晶冰而言, 其强度随初始温度的降低而升高。值得注意的是, 在不同温度条件下, 单晶冰的形变机制发生了变化。温度相对较高时, 主要发生固-液相变, 即压缩过程中出现局部融化, 而后固液界面向内部推移; 然而, 当降低初始温度至一定值后, 则相变机制由固-液相变转变为固-固相变, 即压缩过程中, 出现了不同固态相之间的转化。对于高温条件下, 发生相变后, 应力随应变的增加而缓慢增加; 低温条件下, 相变阶段应力幅值会有急剧下降的过程。这两种不同的形变机制可以对吴先前等人 (Xianqian Wu *et al.* Cold Reg Sci Technol) 的实验结果给出一定解释。他们发现冰的强度在不同温度条件下会出现阶段线性的变化: 当温度高于-125°C, 峰值应力 (强度) 随温度的降低而升高; 当继续降低温度至-173°C 时, 则峰值应力基本维持不变。其原因可能是相对较高温度时, 主要出现局部裂纹扩展、局部融化导致破坏, 冰的强度与传统材料一致, 随温度的降低而增加。当温度降低至一定值后, 则压缩过程中可能会发生冰的固相之间的转化, 则峰值应力不仅与温度相关, 还受相变行为的影响, 从而导致冰的峰值应力在一定温度范围内基本维持不变。

关键词: 冰; 相变; 动态力学响应; 分子动力学

***基金项目:** 多晶冰力学性能的应变率与温度效应及其微观机制 (1140020842); 国家自然科学基金青年基金

通讯作者: 殷秋运, 1990-10-03, 特聘副研究员, 分子动力学/冲击动力学, E-mail: yinqy5@mail.sysu.edu.cn